Charged Phonons IV : Phonon Spin and Charged Phonon

AUTHOR(S):

石井, 忠男

Charged Phonons IV
Phonon Spin and Charged Phonon

岡大・電子工学教室　石 井 忠 男

§1. 序　論

フォノンスピンはVonsovskii－Svirskii[1]によって，等方的な連続媒質に於ける振動子の場に，Noetherの定理[2-3]を応用することにより定義づけられた。この概念は続いてLevine[4]によって同様に議論され，結局積分極フォノンのエネルギー固有値が縮退している場合にのみwell－defineされると結論しうるものである。

一方Messiah[5]に従えば，空間が一様で等方的である場合，任意の物理系の記述に関係したベクトル場$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r})$の空間座標に於ける回転には，スピン$S=1$を有するスピン演算子が伴う。しかしこの定義から生ずる結論は前者のそれとは必らずしも一致しない。何故ならば，いかなる結晶であれ空間座標$\mathbf{r}$は今の場合一様で等方的であり，よってフォノンのベクトル場$\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r})$には，エネルギー固有値の縮退の有無に拘らずスピンが定義できる筈である。我々はこのMessiah のスピンを潜在的精神として議論を進めるであろう。

Jensen[6] はフォノンスピンの具備すべき条件として

$$\mathbf{S}\times\mathbf{S}=i\hbar\mathbf{S} \tag{1a}$$

$\mathbf{S}^2$及びS_zはフォノン総数$\hat{N}$と可換　(1b)

$\mathbf{S}$は$\hat{\mathbf{k}}=\Sigma\mathbf{k}\,b_{\mathbf{k}}^{j+}b_{\mathbf{k}}^{j}$と可換　(1c)

を数え，これらを満足する演算子をVonsovskii－Svirskii(VS)に照らし合わせて書下し，それをスピン演算子［(12)式］と定義した。［(1c)の$\mathbf{k}$は波数ベクトル，$b_{\mathbf{k}}^{j+}$，$b_{\mathbf{k}}^{j}$はフォノンの生成，消滅演算子，$j=(1,2,\cdots 3\nu)$でνは単位胞中の原子の数である］。しかしこのスピン演算子は本文で議論されるように，それ程明確なものでない。

本論文ではNoetherの定理が一義的でないこと，及びベクトル場にはエネルギー固有値の縮退の有無に拘らずスピンが付着していること，を利用してフォノンスピンを定義

する。フォノンの1粒子状態に対して当該定義はMessiah のスピン演算子 $\mathbf{S}^{M}$ と同一であることを示し，かつ荷電フォノン (charged phonon)[7] はフォノンスピンのZeeman分離に相当していることが理解される。次節では問題点を一層具体化する為に，これまで提出されたフォノンスピンを簡単に議論しておく。

§2. Vonsovskii－Svirskii 及び Jensen の定義

Noether の定理

N個の関数 $\varphi_i(x)$ ($i = 1, 2, \cdots\cdots$) によって記述される場を考える。xは時空内の座標であり，iはベクトル成分，テンソル成分，スピノール成分等を表わすものと約束していいが，以下ではベクトル成分と考えておこう。今この時空内で次の無限少回転を行うことを試みよう。 $\{x^n \to x'^n,\ \varphi_i(x) \to \varphi'_n(x')\}$ に対して

$$x'^n = x^n + \sum_{n<\ell} X^k_{m\ell}\ \delta\omega^{m\ell} \tag{2a}$$

$$\varphi'_i(x') = \varphi_i(x) + \sum_{j,k<\ell} A^j_{i,k\ell}\,\varphi_j(x)\ \delta\omega^{k\ell} \tag{2b}$$

$$A^j_{i,k\ell} = g_{ik}\,\delta^j_\ell - g_{i\ell}\,\delta^j_k \qquad (k \leqq \ell) \tag{2c}$$

$$X^k_{m\ell} = g^{\ell\ell}\,x^\ell\,\delta^k_m - g^{mm}x^m\delta^k_\ell \quad (m \leqq \ell) \tag{2d}$$

ここで， $\delta\omega^{mn} = -\delta\omega^{nm}$ 及び計量テンソル $g^{mm} = (1, -1, -1, -1)$ で定義される。ラグランジェ関数 $\mathcal{L}(\varphi_i, \varphi_{i,k})$， $\varphi_{i,k} \equiv \partial\varphi_i/\partial x^k \equiv \partial_k\varphi_i$， に対する作用積分が上記の回転の前後で不変であるという要請より角運動量保存則

$$\partial_k R^k_{\ell m} = 0 \tag{3}$$

$$R^k_{\ell m} = S^k_{\ell m} + M^k_{\ell m} \tag{4}$$

$$S^k_{\ell m} = -\sum_{i\cdot j} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_{i,k}}\ \varphi_j A^j_{i,\ell m} \tag{5}$$

$$M^k_{\ell m} = g^{mm}x^m T^k_\ell - g^{\ell\ell}\,x^\ell\,T^k_m \tag{6}$$

$$T^k_\ell = \sum_i \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi_{i,k}} \varphi_{i,\ell} - L\delta^k_\ell \tag{7}$$

が求められる。定義式 S, M, T はそれぞれスピン角運動量，軌道角運動量，エネルギー運動量に関係するテンソルを表わしている。$R^k_{\ell m}$(k＝0，ℓ＝1，2，3）が空間の回転に伴う量である。

Vonsovskii－Svirskii の定理

等方性弾性媒質中に於けるラグランジェの密度関数は３次元的記法を用いて

$$\mathscr{L} = \Sigma \frac{1}{2} \rho \dot{\varphi}_i^2 - \frac{\lambda}{2} \varphi_{i,i}^2 - \mu \varphi_{i,k}^2 \tag{8}$$

但し，ρ は質量密度，λ, μ は Lame 係数，i, k＝1，2，3 である。彼らは Noether の定理を用いて，運動量密度 **t** 及びスピン密度 **s** を

$$t_\ell \equiv - T^0_\ell = -\rho \sum_i \dot{\varphi}_i \cdot \varphi_{i,\ell} \tag{9}$$

$$s_{\ell m} \equiv S^0_{\ell m} = \rho [\dot{\varphi}_\ell \varphi_m - \dot{\varphi}_m \varphi_\ell] \tag{10}$$

と定義した。従って場の伝播方向を **k**＝(0，0，3）として，VS のスピン演算子は

$$S_3^{vs} \equiv \int s_3(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = i2\rho \int d\mathbf{r} \{ \mathbf{a}_k^+ \times \mathbf{a}_k \}_3 \tag{11}$$

となる。これは一粒子状態に対して固有値 (ħ，0，－ħ) をとることが示される。(11)式の２番目の等号は，a_1, a_2 についてのエネルギーの縮退が条件となっている。定義式 (10)，従って (11) 式は(3)～(7)及び(9)～ (10) 式から判断して符号が正しくないことを付け加えておこう。

Jensen の定義

条件式(1)を満足する次のスピン演算子を導入した。

$$\mathbf{S}^J = \frac{\hbar}{i} \sum_{jj' \mathbf{vk}} b_{\mathbf{k}}^{j+} b_{\mathbf{k}}^{j'} \mathbf{e}_{\mathbf{v}}^{kj*} \times \mathbf{e}_{\mathbf{v}}^{kj'} \tag{12}$$

ここで $\mathbf{e}_{\mathbf{v}} \equiv (e_{\mathbf{v}x}, e_{\mathbf{v}y}, e_{\mathbf{v}z})$ と考えられ, $c_{(\mathbf{v}i)(\mathbf{v}'i')}$ をイオン間相互作用のマトリックス要素として

$$\sum_{\mathbf{v}'i'} c_{(\mathbf{v}i)(\mathbf{v}'i')} e^{j}_{\mathbf{v}'i'} = \omega_j^2 e^{j}_{\mathbf{v}i} \tag{13}$$

と分ける。$\mathbf{v}$ は各単位胞原点から注目している原子へのベクトルを表わす。以上の定義を基にして, フォノンの一粒子状態

$$\Psi = \sum_{j=3}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_i(\mathbf{k})\, b^{j+}_{\mathbf{k}} |0> \tag{14}$$

での $(\mathbf{S}^J)^2$ の期待値は $2\hbar^2$ になることが判る。このことは (13) 式に付帯する条件

$$\sum_{j} e^{kj^*}_{\mathbf{v}i} \cdot e^{kj}_{\mathbf{v}'i'} = \delta_{\mathbf{v}\mathbf{v}'}\, \delta_{ii'},\quad \sum_{\mathbf{v}i} e^{kj^*}_{\mathbf{v}i} \cdot e^{kj'}_{\mathbf{v}i} = \delta_{jj'} \tag{15}$$

を用いて確かめうる。しかし (12) 式は, ノーマル座標 $(\mathbf{k}, j)$ 及び位置座標が混在していて, 複雑であるばかりでなく, 音響及び光学フォノン間でスピンを形成するなど明確でない。自由度は $(\mathbf{k}, j)$ 或は $(\mathbf{k}, \mathbf{v})$ で網羅される以上, そのいずれかで更に簡単に記述できる筈である。この点をふまえて問題点を明確にするために Jensen のコメントを原文のまゝ引用しよう。

〝It should be remarked that the immediate generalization of the spin operator defined for the isotropic case by Vonsovskii and Svirskii is not (12) but rather the quantity $\Sigma_\kappa \varphi_\kappa \times \dot{\varphi}_\kappa$, where the summation runs over all atoms. This generalization is tempting because the said quantity is that part of the real angular momentum of the crystal which does not depend on the origin chosen in the lsttice. However, it does not fulfill the requirements (1b) and (1c). This is due to the fact already pointed out that the knowledge that the crystal is in a one phonon state is incompatible with exact knowledge of, say, the displacements $\boldsymbol{\varphi}_\kappa$.〟

問題点　以上の議論から具体的には次の諸点を明らかにしなければならない。

(I) 異方性結晶に於ける $\Sigma_\kappa \boldsymbol{\varphi}_\kappa \times \dot{\boldsymbol{\varphi}}_\kappa$ の性質を明らかにする。Jensen のコメントにもあるように, この量は一般にはスピン演算子にはなりえないだろう。

(II) 異方性連続媒質に於けるスピン演算子を, Noether の定理より求める。実際

にはこの量も(I)と同様スピン演算子とはかなり得ないだろう。その場合 Noether の定理は事実上スピン演算子を定義しない。

(III) Noether の定理は一義的でないことを利用して，別のスピン演算子が定義しうる。これと Vonsovskii−Svirskii, Jensen のスピンと比較し，更には Messiah のスピンとの関係を明確にする。

(IV) 新たに導入されたスピン演算子の物理的意義とその応用について調べる。

§3. 異方性結晶中の $\Sigma_\kappa \varphi_\kappa \times \dot{\varphi}_\kappa$

今格子系のハミルトニアンを次のようにとる。格子点を κ とおいて

$$H=\sum_{\kappa}\frac{\pi(\kappa)^2}{2m(\kappa)}+\sum_{\substack{\kappa\kappa' \\ xx'}}\frac{1}{2}\Phi_{xx'}(\kappa,\kappa')\varphi_x(\kappa)\varphi_{x'}(\kappa') \tag{16}$$

但し $\pi=\dot{\varphi}$ である。ノーマル座標について

$$H=\sum_{m=1}^{N}\sum_{\lambda=1}^{3}\frac{1}{2}\{p_\lambda(m)^2+\omega_\lambda(m)^2 q_\lambda(m)^2\} \tag{17}$$

一方 $\mathbf{S}\equiv \Sigma_\kappa \varphi_\kappa \times \pi_\kappa$ とおいて同様の変換を行うと

$$S_\lambda=\sum_{m=1}^{N}\sum_{\alpha,\beta}e_{\lambda\alpha\beta}\,q_\alpha(m)\,p_\beta(m) \tag{18}$$

が求まる。 $e_{\lambda\alpha\beta}$ は指標の全てについて反対称で，(λ,α,β) が $(1,2,3)$ の偶置換の場合， $e_{\lambda\alpha\beta}=1$，奇置換の場合 -1 となるとする記号である。従ってフォノン演算子で書くと

$$S_\lambda=\frac{\hbar}{2i}\sum_{\alpha\beta}e_{\lambda\alpha\beta}\gamma_{\alpha\beta}(b_\alpha^{+}-b_\alpha)(b_\beta^{+}+b_\beta) \tag{19}$$

$$=S_\lambda^0+S_\lambda^1 \quad , \qquad \gamma_{\alpha\beta}=\{\omega_\beta\omega_\alpha^{-1}\}^{1/2}$$

$$S_\lambda^0=\sum_{\alpha\beta}\frac{\hbar}{i}\Gamma_{\alpha\beta}^{s}e_{\lambda\alpha\beta}b_\alpha^{+}b_\beta \;, \qquad \Gamma_{\alpha\beta}^{s}=\frac{1}{2}(\gamma_{\alpha\beta}+\gamma_{\beta\alpha}) \tag{20}$$

$$S_\lambda^1=\sum_{\alpha\beta}\frac{\hbar}{i}\Gamma_{\alpha\beta}^{a}(b_\alpha^{+}b_\beta^{+}-b_\alpha b_\beta), \qquad \Gamma_{\alpha\beta}^{a}=\frac{1}{2}(\gamma_{\alpha\beta}-\gamma_{\beta\alpha}) \tag{21}$$

ここで Σ_m は省略してあるが， Σ_m があるものと約束しておく。(20)式は条件(1)を満足

しないうえに，一フォノン状態での固有値は $S^0 \neq 1$ である。一方(21)式も(1)を満足しないから，結局(19)式はフォノンスピンとはなり得ない。しかし $\omega_\alpha = \omega_\beta$ の場合にのみその性質を備える。このようにスペクトルが異方的である場合は，(19)式は必然的に運動の恒量となりえない。

§4. 異方性連続媒質中に於けるNoether定理の帰結

$$\mathscr{L} = \sum_i \frac{1}{2}\dot{\varphi}_\alpha^2 - \Sigma \mathscr{D}_{ii'jj'}\, \varphi_{i',j}\, \varphi_{i,j'} \tag{22}$$

なる関数を考えよう。この式はある回転演算子 $\mathscr{R}$ を用いて

$$\mathscr{L} = \sum_\alpha \frac{1}{2}\dot{\varphi}_\alpha^2 - \sum_{\alpha\beta r} \mathscr{D}_{\alpha\beta r}\, \varphi_{\alpha,\beta}\, \varphi_{\alpha,r} \tag{23}$$

と変換できる。但し $\mathscr{L}(\mathscr{R}^{-1}\mathbf{r}') = \mathscr{L}'(\mathbf{r}') = \varphi'(\mathbf{r}')$ と回転し，改めてダッシュを除いた。(23)式よりハミルトニアンは

$$\mathrm{H} \equiv \int d\mathbf{r}\,\mathscr{H}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda,\mathbf{k}} \frac{1}{2}\pi_{\lambda\mathbf{k}}^2 + \sum_{\lambda,\mathbf{k}} \frac{1}{2}\omega_{\lambda\mathbf{k}}^2\, \varphi_{\lambda\mathbf{k}}^2 \tag{24a}$$

$$\mathscr{H}(\mathbf{r}) = \sum_\lambda \frac{1}{2}\pi_\lambda^2 + \sum_{\lambda\alpha\beta} \mathscr{D}_{\lambda\alpha\beta}\, \varphi_{\lambda,\alpha}\, \varphi_{\lambda,\beta} \tag{24b}$$

$$\omega_{\lambda\mathbf{k}}^2 = \sum_{\alpha\beta} X_{\lambda\alpha\beta}\, k_\alpha k_\beta \quad , \quad X_{\lambda\alpha\beta} = 2\mathscr{D}_{\lambda\alpha\beta} \tag{24c}$$

スピン演算子はNoetherの定理より

$$\mathbf{S} = \int \mathbf{s}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \sum_\mathbf{k} \boldsymbol{\varphi}_\mathbf{k} \times \boldsymbol{\pi}_\mathbf{k} \tag{25}$$

$\Sigma_\mathbf{k}$ は連続体の場合は積分の意と解すことに約束しておく。(25)式は§3の議論と同様一般にはスピン演算子を定義しない。即ち，Noether の定義式(5)は必らずしもスピン角運動量を定義しないということになる。これは正準共役量(π_α, φ_α)が $\hat{\mathrm{N}}$−表示を基準座標とした場合に，成分 α によって絶対値が異なる点に原因している。従って正準共役量の別の一組の可能性を確かめてみる余地はある。これを行う前にベクトル場とスピンについて簡単にふれておこう。

§5. ベクトル場とスピン1の粒子[5,8)]

今$\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r})$を座標軸$O_z$の回りに微少角$\epsilon$だけ回転する。$\ell_z$を軌道角運動量とすると

$$\mathscr{R}_z(\epsilon)\boldsymbol{\varphi}=\{1-i\epsilon(\ell_z+S_z)\}\boldsymbol{\varphi}, \cdots\cdots \tag{26}$$

$$S_z=\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_x=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y=\begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{27}$$

が得られる。S_x, S_yもS_zと同様にして求められている。これらの量は条件(1)を満足し，更に$\mathbf{S}^2=2$となりS＝1のスピン演算子となっている。従ってスピンの波動函数x_μ, $\mu=(1, 0, -1)$とおけば

$$\mathbf{S}^2\chi_\mu=2\chi_\mu, \quad S_z\chi_\mu=\mu\chi_\mu \tag{28}$$

故にχ_μは次の様に定めておけばよい。

$$\chi_1=-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_0=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \tag{29}$$

この関数は又

$$\sum_i \chi^*_{\mu i}\chi_{\mu' i}=\delta_{\mu\mu'}, \quad \sum_\mu \chi^*_{\mu i}\chi_{\mu i'}=\delta_{ii'} \tag{30}$$

の性質を有す。

(26)式の$S_z\boldsymbol{\varphi}$は(2)式の変換と等価である。従って(5)式の$\varphi_i A^j_{i,\ell m}$から由来するのが本節のスピンである。この量は序論で言及した$\mathbf{S}^M$である。

§6. Noether－定理とフォノンスピン

さて再びNoetherの定理を吟味しよう。我々はスピンを定義するのに際して(23)式の　(φ_λ, $\varphi_{\lambda,i}$)を用いたが，必らずしも(φ_λ, $\varphi_{\lambda,i}$)を用いなければならないということはない。それは例えば　(q_λ, $q_{\lambda,i}$)，$q_\lambda=\sqrt{\omega_\lambda}\varphi_\lambda$であってもよい。但し$\omega_\lambda$は時空に依存しない定数とする。ここで改めて(23)式をフーリエ成文に分解しよう。$\mathscr{D}_{\alpha\beta\gamma}$

は定数であることに注意して

$$\mathscr{L}(\mathbf{r}) = \sum_{(\mathbf{k}\,\mathbf{k}')}^{\lambda} \frac{1}{2\sqrt{\omega_{\lambda\mathbf{k}}\omega_{\lambda\mathbf{k}'}}}\left[\dot{q}_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\dot{q}_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \sum_{\alpha\beta} X_{\lambda\alpha\beta}\, q_{\lambda,\beta\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, q_{\lambda,\alpha\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\right] \tag{31}$$

ここで $q_{\lambda\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\omega_{\lambda\mathbf{k}}}\,\varphi_{\lambda\mathbf{k}}$ とし，$\omega_{\lambda\mathbf{k}}$ は(24c)で定義されるものとする。(31) 式のラグランジェ密度函数 $\mathscr{L}(q_\lambda, q_{\lambda,i})$ に対して次のスピン密度が定義しうる。即ち

$$s^{0}_{\beta r}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\lambda\alpha} \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_{\lambda,0\,\mathbf{k}}}\, q_{\alpha\mathbf{k}} A^{\alpha}_{\lambda,\beta r} = \Sigma\, p_{\lambda\mathbf{k}}\, q_{\alpha\mathbf{k}} A^{\alpha}_{\lambda,\beta r} \tag{32}$$

$$p_{\lambda\mathbf{k}} \equiv \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_{\lambda,0\,\mathbf{k}}} = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\lambda\mathbf{k}}\omega_{\lambda\mathbf{k}'}}}\, \dot{q}_{\lambda\mathbf{k}'} \tag{33}$$

従って $\Sigma_{\mathbf{k}}$ を行い，ベクトル記号で表わすと

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{q}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{p}_{\mathbf{k}}\ , \qquad \mathbf{S} \equiv \int \mathbf{s}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \tag{34}$$

一方(31)式より

$$H \equiv \int \mathscr{H}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \sum_{\lambda,\mathbf{k}} \omega_{\lambda\mathbf{k}} \left\{\frac{1}{2} p^2_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2} q^2_{\lambda\mathbf{k}}\right\} \tag{35}$$

であるから，(34) 式を $\hat{N}$ー表示でかけば

$$S_\lambda = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar}{i}\, e_{\lambda\alpha\beta}\, b^{+}_{\alpha\mathbf{k}} b_{\beta\mathbf{k}} \tag{36}$$

この式は，Noether の定理の帰結であるスピン演算子と見看しうる。この議論の類推より§3で論じた場合についても同様に定義しうる。即ちフォノンスピン座標 $(\varphi_\alpha, \pi_\alpha)$ に改め，その上で再び新たな座標 $\{\sqrt{\omega_\alpha}\varphi_\alpha, \pi_\alpha/\sqrt{\omega_\alpha}\}$ について定義することを示唆する。従ってスピンは

$$S_\lambda = \sum_{\ell=1}^{\nu} \sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta} \frac{\hbar}{i}\, e_{\lambda\alpha\beta}\, b^{\ell+}_{\alpha\mathbf{k}} b^{\ell}_{\beta\mathbf{k}} \tag{37}$$

但し ν は単位胞の原子数である。この式はJensenの定義(12)式と異っている。今一粒子状態として

$$\Psi = \sum_{\ell=1}^{\nu} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1}^{3} \varphi^{\ell}_{\alpha}(\mathbf{k})\, b^{\ell+}_{\alpha\mathbf{k}} |0\rangle \tag{38}$$

$$\sum_{\ell,\mathbf{k},\alpha} |\varphi_\alpha^\ell(\mathbf{k})|^2 = 1 \tag{39}$$

と定義すると$<\Psi|\mathbf{S}^2|\Psi> = 2\hbar^2$ を得ることが判る。あるいは(13)及び(15) 式の定義を用いて，$\mathbf{v}$点での成生演算子を

$$b_\alpha^{\mathbf{v}+} \equiv \sum_{\ell=1}^{\nu} b_\alpha^{\ell+} e_{\mathbf{v}\alpha}^{\ell\mathbf{k}*} \quad \text{i. e.} \quad b_\alpha^{\ell+} = \sum_{\mathbf{v}=1}^{\nu} b_\alpha^{\mathbf{v}+} e_{\mathbf{v}\alpha}^{\ell\mathbf{k}} \tag{40}$$

と定義すると，スピン演算子及び一粒子状態はそれぞれ

$$S_\lambda = \sum_{\mathbf{v}=1}^{\nu} \sum_{\mathbf{k},\alpha\beta} \frac{\hbar}{i} e_{\lambda\alpha\beta} b_{\alpha\mathbf{k}}^{\mathbf{v}+} b_{\beta\mathbf{k}}^{\mathbf{v}} \tag{41}$$

$$\Psi = \sum_{\mathbf{v}=1}^{\nu} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1}^{3} \varphi_\alpha^{\mathbf{v}}(\mathbf{k}) b_{\alpha\mathbf{k}}^{\mathbf{v}+} |0> \tag{42}$$

$$\varphi_\alpha^{\mathbf{v}}(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\ell=1}^{\nu} \varphi_\alpha^\ell(\mathbf{k}) e_{\mathbf{v}\alpha}^{\ell\mathbf{k}} \tag{43}$$

$$\sum_{\mathbf{v},\mathbf{k},\alpha} |\varphi_\alpha^{\mathbf{v}}(\mathbf{k})|^2 = 1 \tag{44}$$

となる。但し(15) 式はそのまゝ用いることはできないが(15) 式の $j \to 1 \sim v$ として空間成分$\alpha = 1, 2, 3$はそのまゝにし，$j \to \mathbf{v}(1 \sim \nu)$間で変換マトリックスを形成しておけばよい。ここで$\mathbf{v}$を定義する座標と$\alpha$が形成する座標とは必らずしも一致しない。

以上の議論をふまえて，(12) 式の$\mathbf{S}^J$を少し議論しておこう。今$\sum_{j=1,3\nu} b^{j+} e_{\mathbf{v}m}^{j*} \equiv b_m^{\mathbf{v}+}$とおくと

$$\mathbf{S}^J = \sum_{\mathbf{v},\mathbf{k}} \frac{\hbar}{i} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^{\mathbf{v}+} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^{\mathbf{v}} \tag{45}$$

となる。従って一粒子状態を$\Psi = \sum_{\mathbf{v}m} \varphi_m^{\mathbf{v}}(\mathbf{k}) b_{m\mathbf{k}}^{\mathbf{v}+} |0>$とおけば$<\Psi|(\mathbf{S}^J)^2|\Psi> = 2\hbar^2$となる。但し$\sum_{\mathbf{k}\mathbf{v}m} |\varphi_m^{\mathbf{v}}(\mathbf{k})|^2 = 1$。このことは j についての表現でも同じことであるが，次の理由から(12) 式よりも(37) 式の方がスピン演算子としてより適切であると考えられる。

(I) 結晶が等方的である場合(37) 式のS_λは

$$S_\lambda = \sum_i [\sum_\kappa \boldsymbol{\varphi}_\kappa \times \boldsymbol{\pi}_\kappa]_i \tau_{i\lambda} \tag{46}$$

$$\sum_{i=x,y,z} \tau_{i\lambda}\tau_{i\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \quad , \quad \sum_{\lambda=1}^{3} \tau_{i\lambda}\tau_{i'\lambda} = \delta_{ii'}$$

である。即ち実際の結晶に於ける〝原点のとり方に依存しない角運動量〟の座標回転を示す。このことは座標軸として常に $\{i\} = \{\lambda\}$ ととりうるから，$\mathbf{S} = \Sigma_\kappa \boldsymbol{\varphi}_\kappa \times \boldsymbol{\pi}_\kappa$ である。一方 $\mathbf{S}^J$ も $\Sigma_\kappa \varphi_\kappa \times \boldsymbol{\pi}_\kappa$ となるが，(12) 式に於て位置座標 $\mathbf{v}$ と分極方向が一つの変換によって j に移っている為，$\mathbf{S}^J = \sum_{jj'\mathbf{k}} \mathbf{S}^J_{jj'}(\mathbf{k})$ の $\mathbf{S}^J_{jj'}(\mathbf{k})$ が何を意味するのかそれ程明確でない。

(Ⅱ) スピンは準粒子の内部角運動量であるから，今の場合音響フォノン，光学フォノンの内部変数について定義されるべきである。(37) 式はそれぞれのスピンの和として定義されていて上記の趣旨に沿っている。一方 Jensen のそれは(Ⅰ)に述べた如く意味不明で，かつ音響フォノン，例えば $j = j_a$ と光学フォノン $j = j_o$ とが複合してスピンを形成する場合があり，必らずしも内部変数でスピン形成されていない。

今フォノン $(\ell, \mathbf{k})$ についての1粒子状態ベクトルを $|1_\alpha>$ とおけば，この基底に対する (37) 式の $(S_\lambda/\hbar)$ の行列は $(\ell, \mathbf{k})$ に対して §5 の行列 (27) となる。

§7. 荷電フォノンとフォノンスピン

我々は論文 Ⅱ[9] で対称性の高い結晶について荷電フォノン (charged phonon) を論じた。しかし一般に注意の対称性を有す結晶について

$$H = \sum_{\ell\mathbf{k}\alpha} \frac{1}{2}\{\pi^\ell_{\alpha\mathbf{k}} - \frac{e}{c}A^\ell_{\alpha\mathbf{k}}\}^2 + \frac{1}{2}\{\omega^\ell_{\alpha\mathbf{k}}\varphi^\ell_{\alpha\mathbf{k}}\}^2 \tag{47}$$

とかける。但し $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{H}_0 \times \boldsymbol{\varphi})$ である。一方前節で定義されたスピン (37) は一粒子状態に対しては $\mathbf{S}^M$ となることをみた。この $\mathbf{S}^M \equiv \mathbf{S}$ を用いて (47)式を書き直してみよう。(27) 式より $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = -i(\mathbf{S}\cdot\mathbf{a})\mathbf{b}$ が成立つから (47) 式は $\mathbf{H}_0 = (0, 0, H_0)$ とおいて

$$H_{\ell\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\sum_\lambda [\pi^2_\lambda + \Omega^2_\lambda\varphi^2_\lambda] + i\omega_L \sum_{\gamma\lambda} S_{3\gamma\lambda}\pi_\lambda\varphi_\lambda \tag{48}$$

$$\Omega^2_\lambda \equiv \{\omega^2_\lambda - \omega^2_L \Sigma_\gamma S^2_{3\gamma\lambda}\} \tag{49}$$

ここで添字 $(\ell, \mathbf{k})$ は省略した。

$$\pi_\lambda = \left(\frac{\hbar\Omega_\lambda}{2}\right)^{1/2} (b_\lambda^+ + b_\lambda)$$

$$\varphi_\lambda = -i\left(\frac{\hbar}{2\Omega_\lambda}\right)^{1/2} (b_\lambda^+ - b_\lambda)$$

を用いて

$$H_{\ell\mathbf{k}} = H_{\ell\mathbf{k}}^0 + H_{\ell\mathbf{k}}^1 \tag{50}$$

$$H_{\ell\mathbf{k}}^0 = \sum_\lambda \hbar\Omega_\lambda (b_\lambda^+ b_\lambda + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_L \Sigma S_{3\gamma\lambda}\Gamma_{\gamma\lambda}^s b_\gamma^+ b_\lambda \tag{51}$$

$$H_{\ell\mathbf{k}}^1 = \Sigma\hbar\omega_L S_{3\gamma\lambda}\Gamma_{\gamma\lambda}^a (b_\gamma^+ b_\lambda^+ - b_\gamma b_\lambda) \tag{52}$$

但し $\Gamma_{\gamma\lambda}$ は(20)－(21)式で定義され，$\gamma_{\gamma\lambda} = \sqrt{\Omega_\gamma/\Omega_\lambda}$ である。(29)式の波動函数を用いて(51)式を更に変形してみよう。$b_\lambda^+ = \sum_\mu a_\mu^+ \chi_{\mu\lambda}$ とおいて

$$\begin{aligned} &\sum_{\gamma\lambda} S_{3\gamma\lambda}\Gamma_{\gamma\lambda}^s b_\gamma^+ b_\lambda = \Gamma_{12}^s S_{3\mu} b_\mu^+ b_\mu \\ &S_{3\mu}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle \\ &\Sigma_\gamma S_{3\gamma\lambda}^2 = -S_{3\mu}^2 \end{aligned} \tag{53}$$

$\omega_1 = \omega_2 = \omega$ の場合は，$\Gamma^a = 0$，$\Gamma^s = 1$ であるから

$$\begin{aligned} &H_{\ell\mathbf{k}}^0 = \Sigma (b_\mu^+ b_\mu + \frac{1}{2})\hbar\omega_\mu \\ &\omega_\mu = \Omega_\mu - \omega_L S_{3\mu}, \quad \Omega_\mu^2 = \omega^2 + \omega_L^2 S_{3\mu}^2 \end{aligned} \tag{54}$$

これが文献7)で示された荷電フォノンであり，そのエネルギー固有値は $-g\mu_B \mathbf{S}\cdot\mathbf{H}_0$，[$g = \langle M\rangle/M^*$, $\mu_B = Ze/2\langle M\rangle c$，$\omega_L \equiv ZeH_0/2M^*c$，$\langle M\rangle$：イオンの平均質量，$M^*$：$\omega_L$ で定義される(ℓ, $\mathbf{k}$, μ)モードの有効質量である。]で縮退がとける。

$\omega_1 \neq \omega_2$ で異方性のある場合は，(54)式のように直接固有値は求まらない。この場合は(ω_1, ω_2, ω_L) 相互間の大小関係によって様々な場合が生じ，それに応じて摂動論 etc を用いる必用がある。今 $\omega_L \ll \omega_1, \omega_2$ で $\omega^i = \omega_1$ の音波を注入したとしよう。出力としては当然 $\omega^0 = f(\omega_1, \omega_2)$ となる。これはスピンの為に $\omega_1 \rightarrow \omega_2$ の遷移が生ずるか

らである。即ちスピンは，前節最後の説明からも判るように，何らかの外力，によって離散的な空間回転を引きおこすことになる。この外力は電子系，フォトン系，あるいはフォノン同士の衝突など様々な要因が考えられる。

結局荷電フォノンのスペクトルは，フォノンスペクトルのスピンによるゼーマン分離ということになる。このことは音響型及び光学型の両者で生ずるが，後者では前者程効力は大きくない。我々は §2 で問題点(Ⅳ)を設定したが，現在までの段階では応用という応用を掲げるまでに到っていない。ただその典型的な例を荷電フォノンに見出すことが出来ることを報告し一応本小論を終えることにする。

なお終えるに当って常日頃御教示頂いている万成教授及び田中教授に感謝の意を表す。

参考文献

1) S. V. Vonsovskii and M. S. Svirskii: Soviet Phys. Solid State 3 (1962) 1568.
2) N. N. Bogoliubov and D. V. Shirkov: Introduction to the Theory of Quantized Fields(Interscience, New York, 1959) Chap. 1.
3) T. Yamanouchi, R. Utiyama and T. Nakano: Theory of General Relativity and Gravitation (Syokabo, Tokyo, 1967) Chap. V.
4) A. D. Levine: Nuovo Gimento 26 (1962) 190.
5) A. Messiah: Mecanique Quantique, trans. S. Koide and J. Tamura (Tokyo-Tosho, Tokyo, 1972) Vol. 2. Chap. 13.
6) H. H. Jensen: Phonons Phonon Interaction, ed. T. A. Bak (Benjamin, New York, 1964) p. 1.
7) T. Ishii: Bussei-Kenkyu 19 (1972) 186.
8) A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii: Quantum Electro-dynamics (Interscience, New York, 1965) Chap. 1.
9) T. Ishii: Bussei-Kenkyu 19 (1973) 369.